



PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

ODORANTS ATMOSPHERIC DISPERSION FORECAST AROUND A PULP MILL PLANT

D. Cartelle¹, J.M. Vellón¹, A. Rodríguez^{1,2}, D. Valiño^{1,2}, J.A. González², M. Bao² y C. Casas³

¹ Troposfera Soluciones Sostenibles, c/ Real, 217 - Bajo, 15401 Ferrol, A Coruña, España.

² Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España.

³ ENCE-Pontevedra, Avda. de Marín, Pontevedra, España

A stylized, handwritten signature in dark ink, likely belonging to Manuel Bao Iglesias.

Homenaxe ao Profesor
Manuel Bao Iglesias

INDICE

- 1. Introducción**
- 2. Metodología**
- 3. Modelización meteorológica. Validación**
- 4. Emisiones. TRS vs OLOR**
- 5. Dispersión de olores. Validación**
- 6. Explotación de resultados**
- 7. Conclusiones**

1. Introducción

ence es el líder europeo en producción de celulosa de eucalipto, primera empresa española en producción de energía renovable con biomasa forestal.

La planta de **ence** en **Pontevedra** (Galicia) produce celulosa de eucalipto de alta calidad y energía renovable a partir de biomasa.

Año 2010: Comienza el plan de Eliminación de Olores en la planta de

Pontevedra: "**Compromiso Olor Cero**" 

Año 2015: **ence** invertirá **8 millones de euros** adicionales en tecnología y adaptaciones para reducir y minimizar el olor.



AÑO 2010

EPISODIOS DE OLOR

4.000 minutos /mes

PLAN OLOR CERO



AÑO 2015

EPISODIOS DE OLOR

29 minutos/mes

PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

1.1. Localización



PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

1.2. Antecedentes (I)

El olor de las **plantas de celulosa Kraft** está causado principalmente por cuatro compuestos volátiles reducidos del azufre (VSCs): **Sulfuro de hidrógeno (H_2S)**, **metil mercaptano (CH_3SH)**, **sulfuro de dimetilo ($(CH_3)_2S$)** y **disulfuro de dimetilo ($(CH_3)_2S_2$)**.

Estos gases se denominan “compuestos reducidos del azufre (“total reduced sulphur” - **TRS**)”, y sus emisiones se denominan “emisiones TRS” (Smook, 2002).

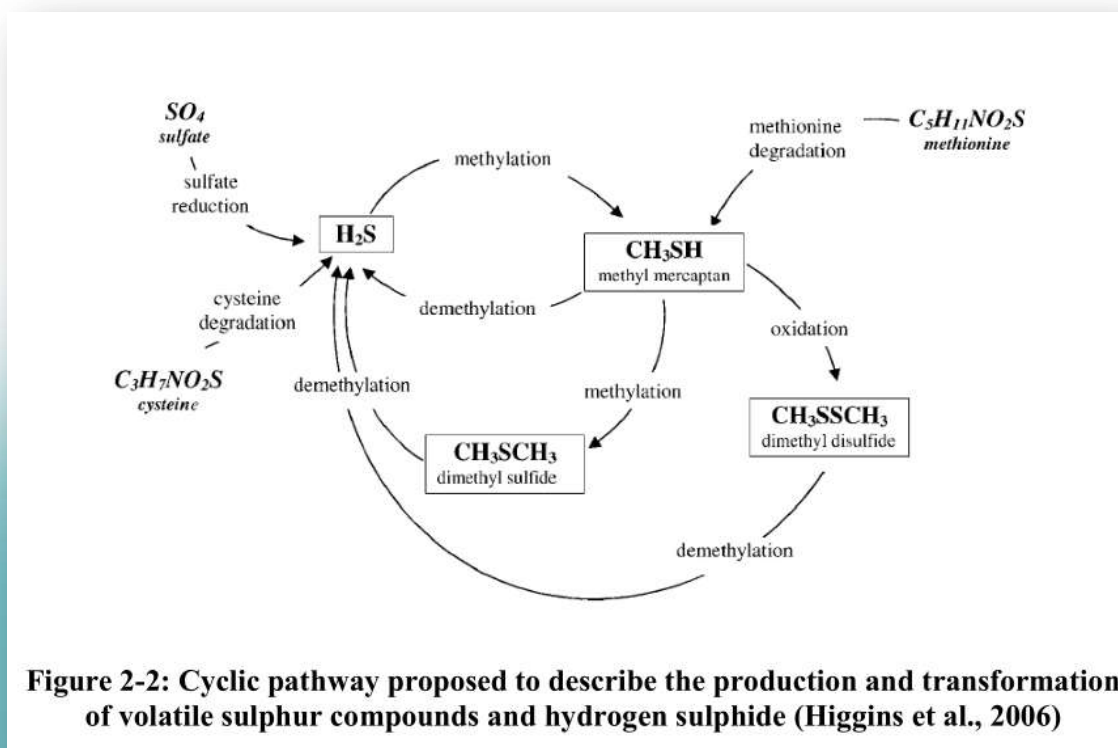
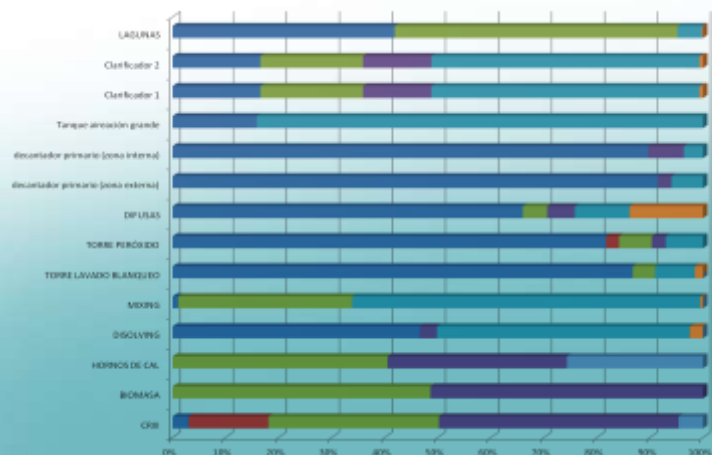


Figure 2-2: Cyclic pathway proposed to describe the production and transformation of volatile sulphur compounds and hydrogen sulphide (Higgins et al., 2006)

1.2. Antecedentes (II)



APLICACIÓN
Reconducción
fuentes.
Ingeniería
proceso

REDUCCIÓN
TRS



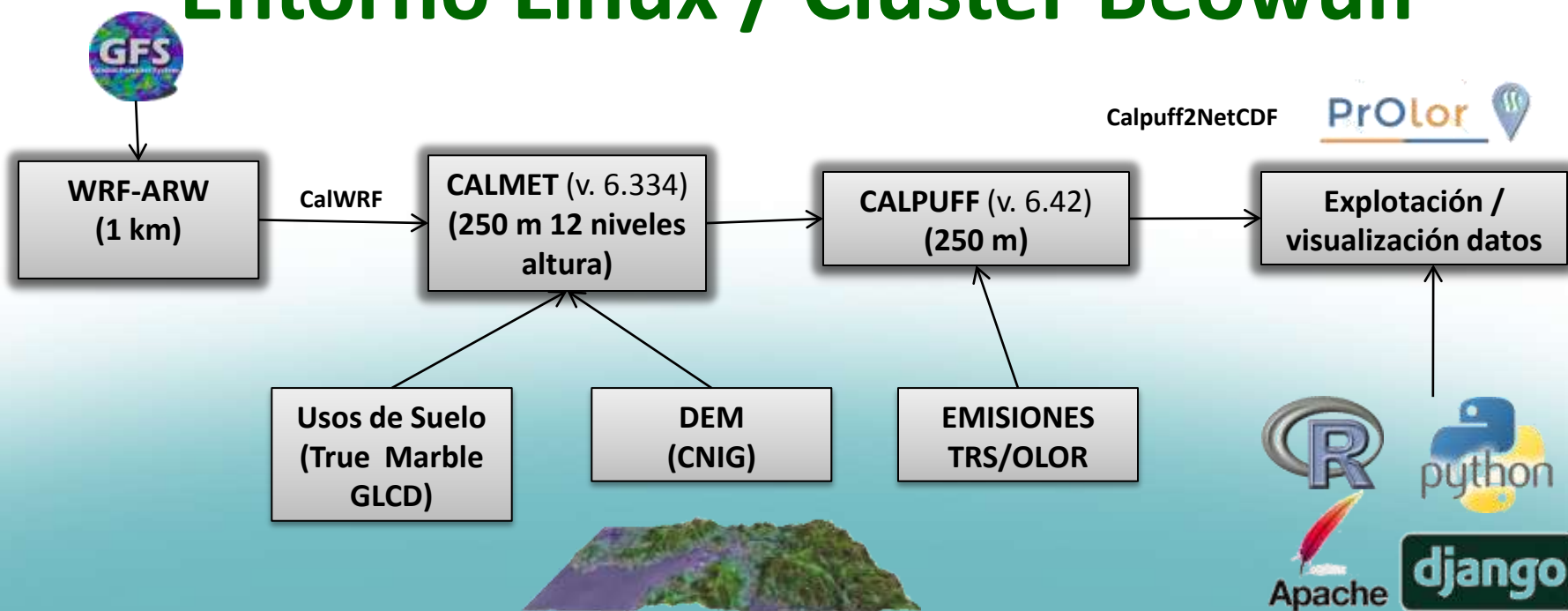
PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

2. Metodología

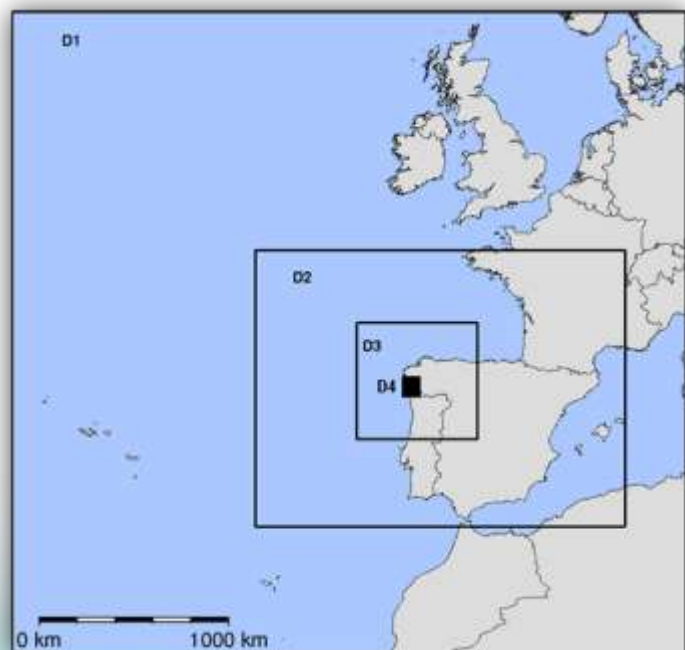
Simulación y predicción de los eventos de olor mediante modelización numérica

Sistema de Modelos: **WRF/CALMET/CALPUFF** (*Scire et al., 2000*)

Entorno Linux / Cluster Beowulf



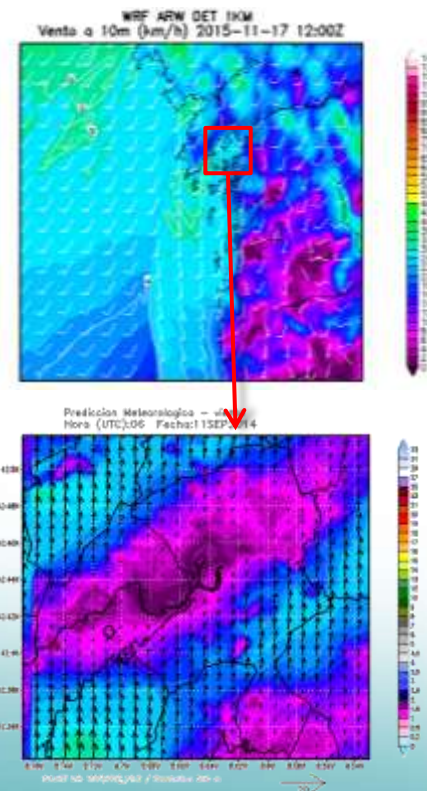
3. Modelización meteorológica



WRF

1 km

CALMET
250 m



Physics:

Radiation: Longwave RRTM, Shortwave MM5-Dudhia
PBL: YSU (with sfclay: Monin-Obukhov from MM5 MRF)
Surface: 5 layer MM5 LSM
Cumulus: Kain-Fritsch
Microphysics: WSM6

CALMET: resolución vertical 12 niveles en altura (González et al., 2014): 0, 20, 40, 79, 176, 290, 439, 640, 1180, 1580, 2062, 3354 y 4162 m.

Se han ensayado **3 configuraciones CALMET** distintas, variando esencialmente los **niveles en altura**, el **radio de influencia topográfico (TERRAD)**, la activación/desactivación del **módulo cinemático (IKINE)** y el parámetro de ajuste de la **velocidad vertical del viento (IOBR)**.

3. Modelización meteorológica: Validación

🌡 Temperatura

TEMPERATURA											
WRF											
Estación	n	FAC2	MB	MGE	NMB	NMGE	RMSE	r	COE	IOA	
1 Castrove	3672	1.0	1.7	2.0	0.1	0.1	2.4	0.9	0.5	0.7	
2 Mourente	3672	1.0	-0.9	1.8	-0.1	0.1	2.1	0.9	0.5	0.8	
CALMET											
Estación	n	FAC2	MB	MGE	NMB	NMGE	RMSE	r	COE	IOA	
1 Castrove	3672	1.0	0.3	1.2	0.0	0.1	1.5	1.0	0.7	0.9	
2 Mourente	3672	1.0	0.1	1.3	0.0	0.1	1.8	0.9	0.6	0.8	

🌬 V. Viento

VELOCIDADE DO VENTO											
WRF											
Estación	n	FAC2	MB	MGE	NMB	NMGE	RMSE	r	COE	IOA	
1 Castrove	3672	0.6	-0.3	2.2	-0.1	0.6	3.0	0.3	0.0	0.5	
2 Mourente	3672	0.3	2.1	2.4	1.4	1.5	2.9	0.5	-1.7	-0.3	
CALMET											
Estación	n	FAC2	MB	MGE	NMB	NMGE	RMSE	r	COE	IOA	
1 Castrove	3672	0.8	-0.4	1.5	-0.1	0.4	2.0	0.7	0.3	0.7	
2 Mourente	3672	0.4	1.9	2.1	1.3	1.3	2.6	0.5	-1.4	-0.2	

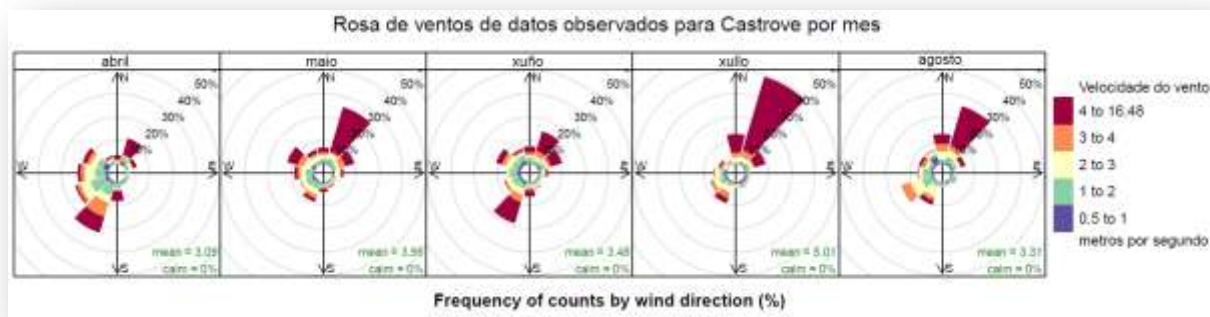
💧 H. Relativa

HUMIDADE RELATIVA											
WRF											
Estación	n	FAC2	MB	MGE	NMB	NMGE	RMSE	r	COE	IOA	
1 Castrove	3672	1.0	-9.0	11.0	-0.1	0.1	13.3	0.9	0.3	0.7	
2 Mourente	3667	1.0	-7.4	10.4	-0.1	0.1	13.6	0.8	0.2	0.6	
CALMET											
Estación	n	FAC2	MB	MGE	NMB	NMGE	RMSE	r	COE	IOA	
1 Castrove	3672	1.0	-6.2	8.0	-0.1	0.1	10.4	0.9	0.5	0.7	
2 Mourente	3667	1.0	-9.3	10.9	-0.1	0.1	13.7	0.9	0.2	0.6	

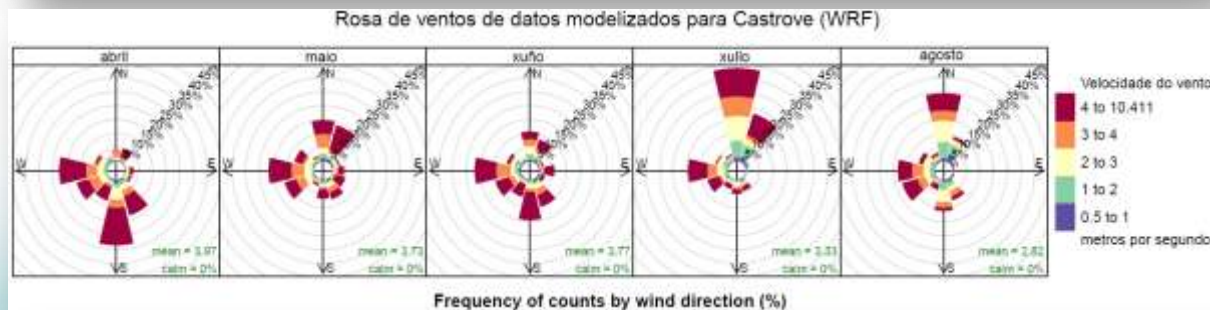
Lenguaje R y módulo Openair (Carslaw y Ropkins, 2012): Cálculo de rosas de vientos y distintos estadísticos con criterios de aceptación (Fan et al., 2000; Chang and Hanna, 2004; Emery et al., 2001)

3. Modelización meteorológica: Validación

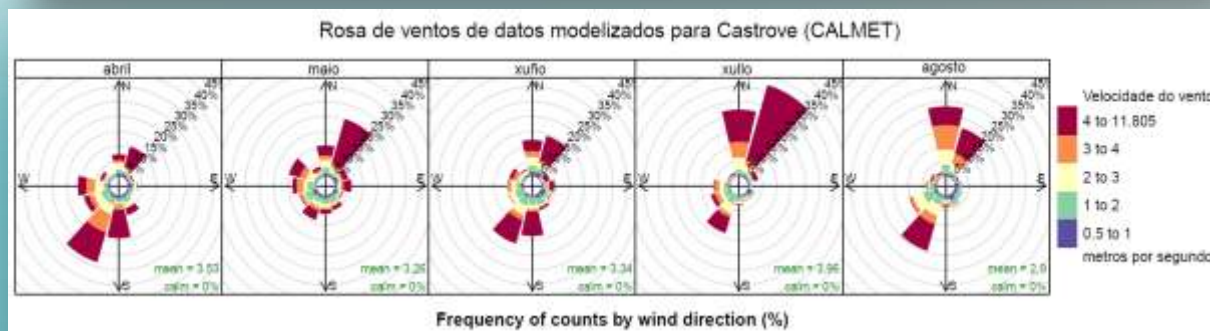
Observaciones →



WRF →



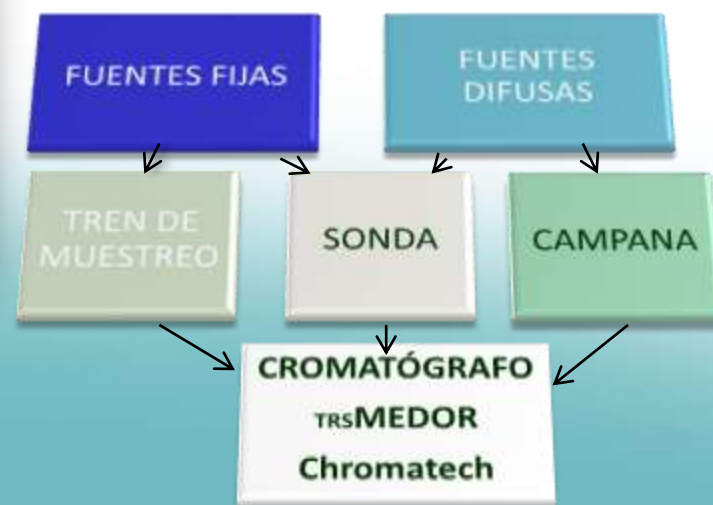
CALMET →



4. Emisiones

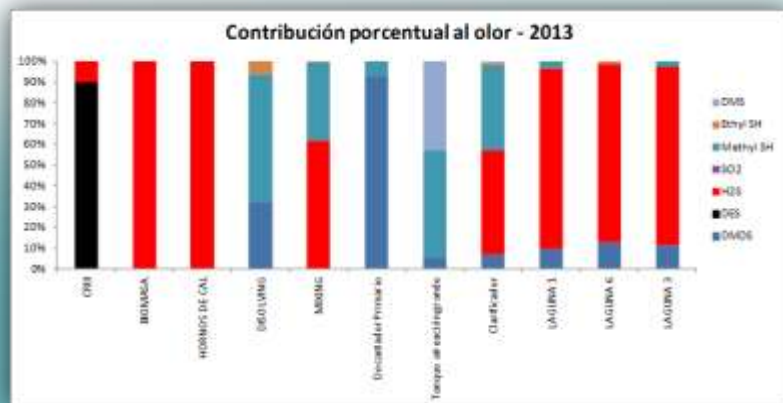
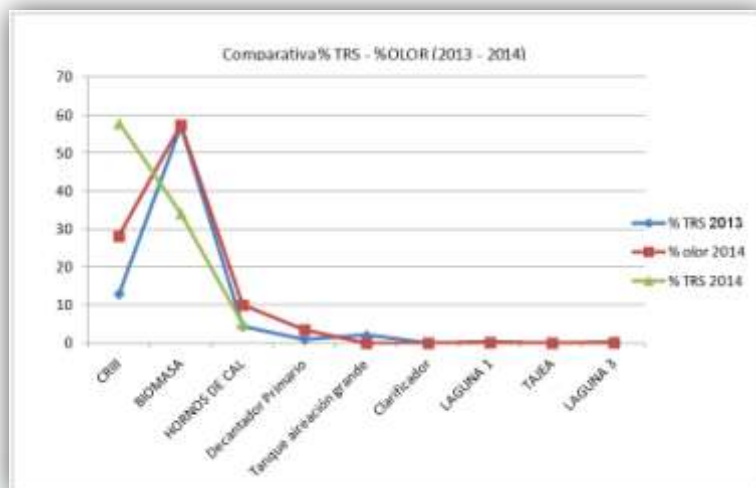
DOS CAMPAÑAS DE MEDIDA DE EMISIONES:

- 1.- Cuantificación y caracterización de **emisiones TRS**. (2013) TROPOSFERA SOLUCIONES SOSTENIBLES, S.L. y la UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA.
- 2.- **Medidas de olor** realizadas por la empresa LABAQUA, determinación por olfatometría dinámica, en el año 2014.



PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

4. Emisiones: Correlación TRS vs. OLOR



✓ **Correlación** entre concentración de olor y concentración de las especies químicas odorantes:
Ley de Stevens. H_2S , único compuesto del que se ha obtenido experimentalmente (Gostelow et al., 2000) una **correlación ajustada según la ley de Stevens**:

$$C(uo) [uo/m^3] = 2000 \cdot C(H_2S) [ppm]$$

✓ Contribución de los distintos compuestos al olor:
OAV (Odor Activity Value): significancia relativa de los distintos compuestos químicos en los niveles de olor. división entre la concentración del compuesto odorante y su umbral de olor (Qian & Reineccius, 2003; McGinley et al., 2008).

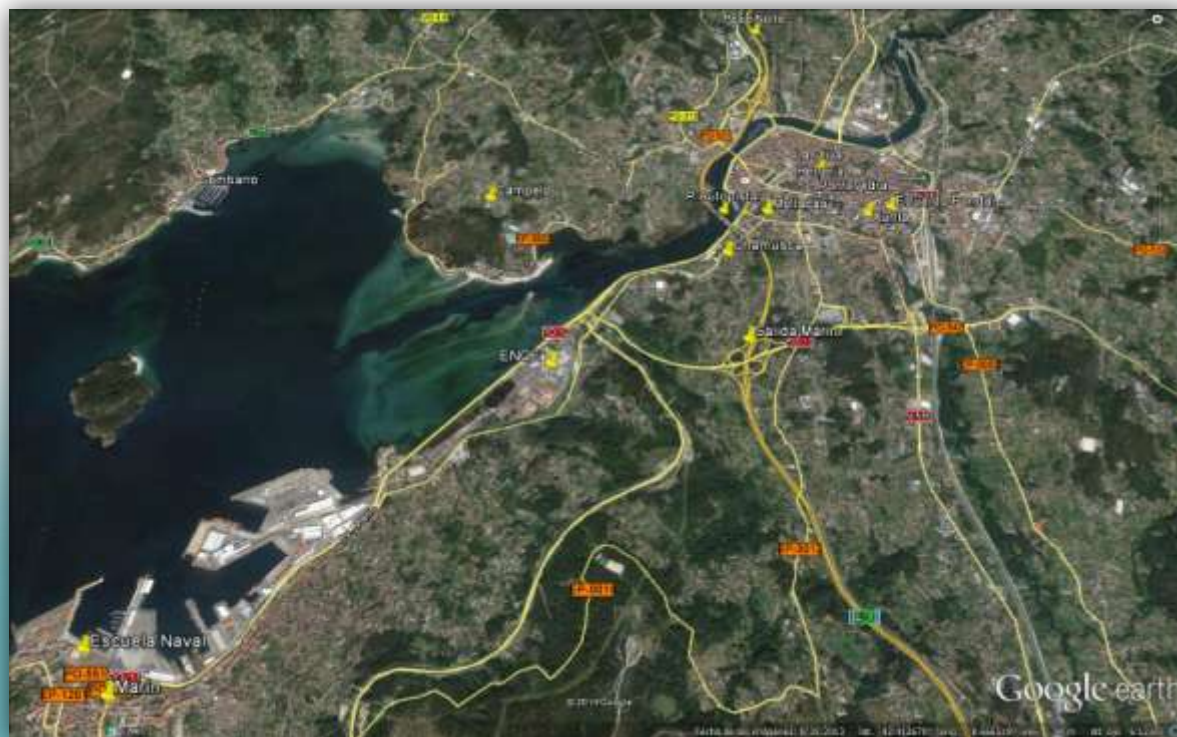
Correlación emisiones de H_2S en la campaña 2013 y la $[H_2S]$ calculada (L. Stevens) a partir emisiones de Olor de la campaña 2014: $R^2=0.82$

5. Dispersión de odorantes: Simulación

CALPUFF. Área de 16x16 km en torno a las instalaciones de ENCE Pontevedra:

- Celdas de **250 m de resolución. 12 niveles en altura** (capa límite)
- 20 receptores discretos de control:

- Escuela Naval
- Campelo
- Areeiro
- Peaje N
- Peaje S
- Salida Marín
- Pontevedra
- Marín
- ENCE
- Mollabao Gasolinera
- Manuel de Palacio
- Herrería
- La Oliva
- Eduardo Pondal
- Xunta
- Estación ferrocarril
- Pasarón
- Ponte da Barca
- Puente Autopista
- Rotonda



5. Dispersión de odorantes: Simulación

- 1.- Modelización de **5 contaminantes**: Sulfuro de hidrógeno (H_2S), metil mercaptano (CH_3SH), sulfuro de dimetilo ($(\text{CH}_3)_2\text{S}$) y disulfuro de dimetilo ($(\text{CH}_3)_2\text{S}_2$) y dióxido de azufre (SO_2). Posteriormente también la concentración de olor.
- 2.- Opciones de deposición: **Deposición seca en forma gaseosa**. No se ha tenido en cuenta la deposición húmeda.
- 3.- Para la **deposición seca** de los distintos odorantes se han fijado las **propiedades químicas** basadas en datos de la bibliografía.

Dry (Gas) [Dry Particle] [Wet]					
Species	Diffusion Coeff (cm ² /s)	Alpha Star	Reactivity	Stoich. Weight (g/mol)	Henry's Law Coeff.
H2S	0.1509	1.0	18.0	0.0	8.70E-02
C2H6S2	0.1509	1.0	18.0	0.0	8.60E-01
C2H6S	0.1509	1.0	18.0	0.0	4.80E-01
CH4S	0.1509	1.0	18.0	0.0	2.00E-01
SO2	0.1509	1000.0	9.0	0.0	4.80E-02

	Hydrogen sulphide ^a	Methyl mercaptan ^b	Dimethyl sulphide ^c	Dimethyl disulphide ^d	Carbonyl sulphide ^e	Carbon disulphide ^f	Sulphur dioxide ^g
Chemical formula	H ₂ S	CH ₃ SH	C(CH ₃) ₂ S	C(CH ₃) ₂ S ₂	CSO	CS ₂	SO ₂
Molecular weight	34.08 g/mol	48.11 g/mol	62.14 g/mol	94.2 g/mol	60.075 g/mol	76.14 g/mol	64.065 g/mol
Boiling point	-60.4°C	6°C	37.3°C	109.8°C	-30°C	-46°C	-10.0°C
Melting point	-85.5°C	-123°C	-96.3°C	-65 °C	-138.8°C	-112.3°C	-75.5°C
Water solubility	3.09 g/L at 20°C	15.4 g/L at 25°C	22 g/L at 25°C	Insoluble	1.3 g/L at 25°C	2.16 g/L at 25°C	113 g/L at 20°C
Vapour density (Air =1)	1.189	1.66	2.14	3.24	2.1	2.67	2.263
Vapour pressure	15000 mm Hg at 25°C	1310 mm Hg at 25°C	302 mm Hg at 25°C	28.7 mm Hg at 25°C	9812 mm Hg at 25°C	359 mm Hg at 25°C	3000 mm Hg at 25°C
Henry's law constant at 25°C	8.7 x 10 ⁻² M/atm ^h	2.0 x 10 ⁻¹ M/atm ^h	4.8 x 10 ⁻¹ M/atm ^h	9.6 x 10 ⁻¹ M/atm ^h	2.2 x 10 ⁻² M/atm ^h	5.5 x 10 ⁻² M/atm ^h	1.4 M/atm ^h

- 4.- Se han considerado para este estudio todas las **fuentes**, incluyendo las emisiones de fuentes difusas (depuradora, lagunas, etc.)
- 5.- Con el objeto de detectar aquellos valores subhorarios capaces de producir eventos de olor de corta duración, se introduce en el modelo una **Relación de Máximo al Promedio** (peak to mean ratio).

5.1. Relación máximo al promedio (**peak-to-mean**)

Se ha utilizado el esquema basado en la expresión (Smith, 1973; Piringer et al., 2012):

$$\frac{C_p}{C_m} = \left(\frac{t_m}{t_p}\right)^u$$

donde:

C_p= Concentración promedio horaria

C_m= Concentración minutal “pico”

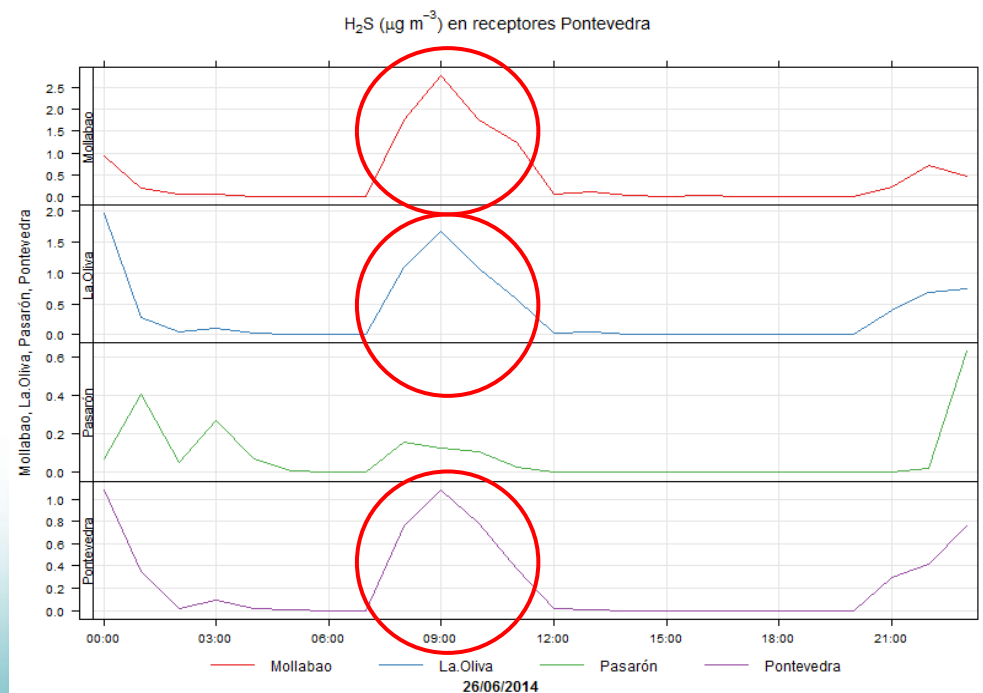
T_m= tiempo de integración de la concentración C_p

T_p= Periodo de integración del “pico”

U= exponente que depende de la estabilidad atmosférica.

Aplicando esta fórmula para datos horarios (típicamente, el período de los resultados de los modelos aplicados), y asumiendo una **concentración pico de 30 s**, se obtienen los ratios de máximos al promedio (ψ_0) para cada clase de estabilidad.

5. Dispersión de odorantes: Validación (I)



- Periodo simulación: **abril-agosto de 2014.**

- Panel olfatométrico de campo: **personal de la propia planta ENCE Pontevedra.**

- En la validación cualitativa del sistema PrOlor solo se han **registrado por el panel 34 eventos de olor de corta duración.**

- **H₂S como gas trazador de los eventos de olor**, siendo éste el odorante con menor umbral de olor de los emitidos por la planta.

Simulación de “pico” de olor a través del sistema **PrOlor**, detectado por panelistas de ENCE

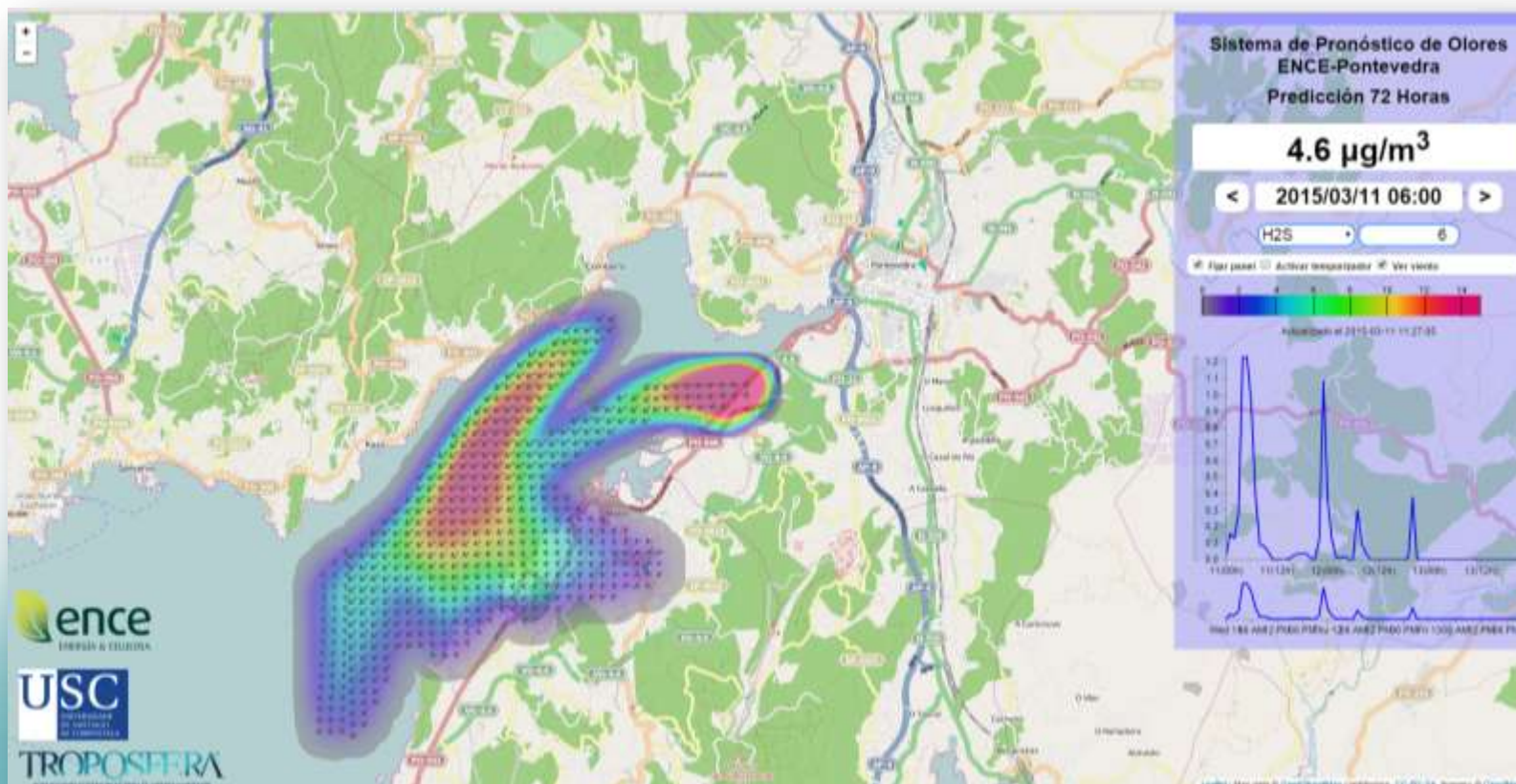
5. Dispersión de odorantes: Validación (II)

El sistema de modelos WRF 1km/CALMET/CALPUFF resuelve, con un alto porcentaje de acierto, los eventos registrados mediante olfatometría.

**De los 34 eventos de olor registrados,
PrOlor fue capaz de predecir 32:**

- 26 eventos han sido simulados correctamente en lugar y hora.
- 6 eventos han sido simulados en el mismo día, pero antes de tiempo: por ejemplo, el evento fue de noche y el modelo predice por la tarde).
- 2 eventos no han sido reproducidos por PrOlor; sin embargo, en estos eventos hay que distinguir:
 - a) 1 evento provocado por un incremento accidental de la emisión de H_2S registrado en la planta (stripping), que lógicamente tampoco se contempla en el inventario de emisiones estacionario aplicado: 12/6/2014.
 - b) 1 evento no han sido reproducidos por PrOlor, no existiendo variación en las emisiones de la planta que lo justifique: 11/5/2014.

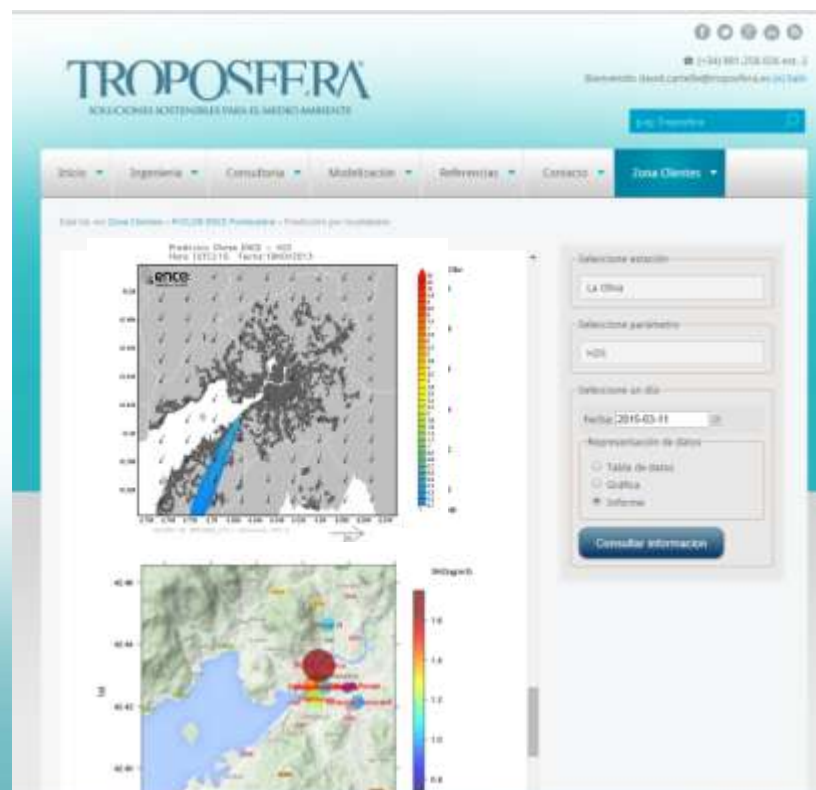
6. Explotación de resultados (I)



PANTALLA DE DISPERSIÓN DE LA PLUMA INSTALADA EN EL CENTRO DE CONTROL R + JAVASCRIPT: procesado “al vuelo” de ficheros netCDF

PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

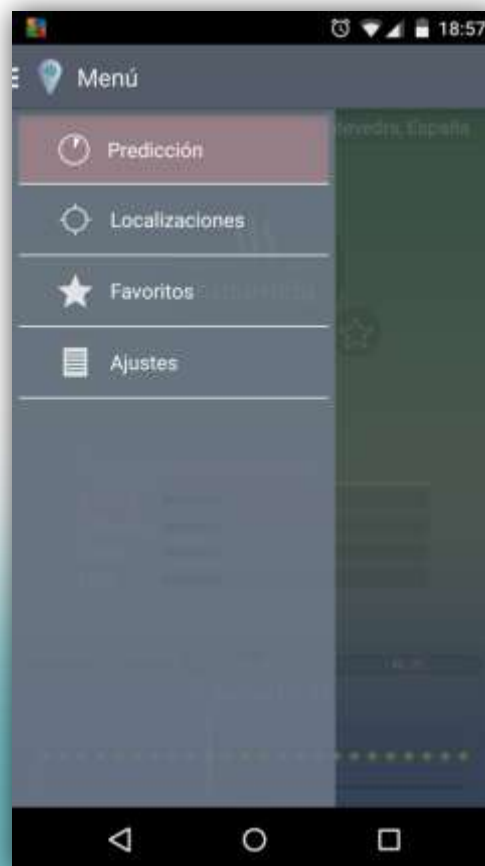
6. Explotación de resultados (II)



SISTEMA DE GESTIÓN DE PRONÓSTICOS E INCIDENCIAS

PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

6. Explotación de resultados (III)



APP dispositivos ANDROID

PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE
UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

7. Conclusiones (I)

SOBRE LA VALIDACION DEL MODELO METEOROLOGICO CALMET

CALMET mejora los resultados de WRF, en especial con la activación del módulo cinemático (IKINE = 1) y el parámetro de ajuste de la velocidad vertical del viento (IOBR=1).

SOBRE LAS EMISIONES MEDIDAS EN LAS CAMPAÑAS 2013 Y 2014

- Perfiles similares entre campaña TRS 2014 y Olores 2014
- Concentraciones de olor sustancialmente mayores que las TRS equivalentes aplicando la Ley de Stevens y el OAV

SOBRE LA VALIDACION DEL SISTEMA DE MODELOS de PrOlor FRENTE AL REGISTRO DE OLOR

- Alto porcentaje de acierto.
- Generalmente, a mayor resolución vertical, mayores son las concentraciones en superficie calculadas por CALPUFF.
- Mal ajuste de la magnitud de los eventos de olor: El módulo cinemático no siempre supone mejoras y a veces, perjudica los resultados del modelo.

7. Conclusiones (II)



- Actualización y ampliación de las emisiones medidas de odorantes TRS.
- Validación del modelo de dispersión CALPUFF durante episodios en los que se cuente con medidas cuantitativas de inmisión de odorantes TRS en aire ambiente
- Calibración del sistema de modelos
- Optimización del método de “Relación de Máximo al Promedio” aplicado.

PREDICCIÓN DE LA DISPERSIÓN ATMOSFÉRICA DE ODORANTES EN EL ENTORNO DE UNA PLANTA DE PASTA DE CELULOSA

David Cartelle

david.cartelle@troposfera.es

davidcartelle@prolor.net

Agradecimientos

5.1. Relación máximo al promedio (**peak-to-mean**) (II)

Clase de estabilidad	Tipo	u	ψ_0
A	Muy inestable	25.9	54.74
B	inestable	13.9	25.47
C	neutral	7.8	12.57
D	Ligeramente estable	4.2	5.85
E	Estable	2.4	2.88
F	Muy estable	2.4	2.88

Así, dependiendo de la clase de estabilidad (Pasquill-Guifford) y del tipo de fuente emisora, la relación de máximos al promedio será distinta. Su aplicación consiste en multiplicar por un factor dado las emisiones del modelo, dependiendo como se ha dicho de la estabilidad y el tipo de fuente (puntual, en superficie, en altura, de área, volumen, ...)